



TITLE:

格子模型の厳密解と生態系 (第6回 生物数学の理論とその応用)

AUTHOR(S):

南, 和彦

CITATION:

南, 和彦. 格子模型の厳密解と生態系 (第6回生物数学の理論とその応用). 数理解析研究所講究録 2010, 1704: 158-164

ISSUE DATE:

2010-08

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/170035>

RIGHT:

格子模型の厳密解と生態系

Exact results in lattice models as model ecosystems

南 和彦 (Kazuhiko Minami)

名古屋大学・院・多元数理科学研究科

Grad. School of Math., Nagoya Univ.

e-mail: minami@math.nagoya-u.ac.jp

1 序章

生態系において、空間構造を考慮するためには格子模型が導入される。これらの格子模型は、しばしば磁性体における種々の格子模型と等価になることが知られている。磁性体の格子模型はスピン模型あるいはスピン系と呼ばれ、統計力学の研究対象として古くから調べられて来た [1][2]。特に日本はこの分野の研究に関して長い伝統がある。スピン系については、様々な格子上の様々な相互作用を持つ模型が研究され、種々の近似手法や数値計算の技術が非常に高度に発達している。またいくつかの代表的な模型について厳密解が知られ [3]、さらに模型と模型との等価性 [4] が知られている。ここで等価性という意味は、パラメータの適当な対応によって、その模型の物理量と別の模型の物理量との間に、近似を含まない解析的な関係が成り立つということである。

この論文の趣旨は、ひとつの生態系に等価なスピン模型があり、その模型に等価な別のスピン模型があったとき、その第二のスピン模型に等価な生態系があるのではないか。その場合、これらの生態系は生物としては別種のものであっても、その変化の少なくとも一部は、共通の数理構造に支配されているのではないか、ということを指摘することにある。

2 格子模型

磁性体とはおおまかには磁石のことで、原子が適当な格子を組んでならび、それぞれが磁気モーメントをもち、隣り合う磁気モーメントどうしの相互作用によってエネルギーを持つ。この相互作用は量子力学的なものである。この磁性体の数理模型が、格子上のスピン模型である。それぞれの磁気モーメントは角運動量であり、以下の交換関係によってその性質が決定される：

$$[s_i^x, s_i^y] = is_i^z, \quad [s_i^y, s_i^z] = is_i^x, \quad [s_i^z, s_i^x] = is_i^y. \quad (1)$$

ここで s_i^x, s_i^y, s_i^z はサイト i 上のスピンの x, y, z 成分であり、各サイト i のスピンは隣接するサイト j のスピンと相互作用し、それは J を結合定数として $-J(s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + s_i^z s_j^z)$ と書かれる。さら

に相互作用するサイトのペア $\langle i, j \rangle$ すべてについてこの総和をとったものが、系のハミルトニアン H である：

$$H = -J \sum_{\langle i, j \rangle} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + s_i^z s_j^z) \quad (2)$$

この H の固有値が、この系で実現するエネルギー Spektrum になる。これは Heisenberg 模型とよばれる。

量子力学としては初等的なことであるが、スピンの演算子としての作用を説明する。いまスピンの大きさが $1/2$ の場合を考えると、サイト i において許される状態は s_i^z の固有状態として 2 つあり、これらをスピンが up と down の状態と呼ぶことにする（一般にスピンが S の場合には、 $n = 2S + 1$ 状態になる）。up に s_i^z を作用させると固有値 $1/2$ が、down に s_i^z を作用させると固有値 $-1/2$ が現れる。したがってハミルトニアン H の最後の項 $s_i^z s_j^z$ は、隣り合う二つの原子の状態が決まればエネルギーがその固有値の積として得られる項であるということがわかり、この部分を Ising 相互作用とよぶ。

格子模型の相互作用としてこの Ising 相互作用だけを考えるものを Ising 模型という。Ising 模型は 1925 年に Ising[5] が詳しく調べ、特に 1 次元の場合について解を得ている。さらに 1941 年に Kramers と Wannier[6] によって、また独立に 1943 年に久保 [7] によって、より見通しのよい伝送行列の方法を導入することで厳密解が得られている。2 次元の Ising 模型は 1944 年に Onsager[8] によって厳密解が得られた。

次に、 $s_i^{\pm} = (s_i^x \pm i s_i^y)/2$ とすると、 s_i^+ は down を up に、 s_i^- は up を down に反転させる。このときハミルトニアン H のはじめの二つの項 $s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y$ は $(s_i^+ s_j^- + s_i^- s_j^+)/2$ に一致し、これは隣り合う 2 つのスピンを反転させる項であると理解できる。例えば down-up に $s_i^+ s_j^-$ を作用させると up-down になり、 $s_i^- s_j^+$ を作用させると 0 になり、全体としては up-down に比例する項に変わる。また up-down に同じ $(s_i^+ s_j^- + s_i^- s_j^+)/2$ を作用させると同様に down-up に比例する項が現れる。これは 2 体の flip を示す項であり、ハミルトニアンは 2 体の flip の項と状態の積の項の和になっていると考えることができる。

相互作用としてこの $s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y$ だけを考えるものを XY 模型とよぶ。この場合、 H は 2 体の flip の総和であり、Ising 相互作用とは違って少々非自明である。この模型は 1 次元で 1962 年に桂 [9] により、また 1967 年に Niemeijer[10] によって、より一般にハミルトニアンに z 方向の磁場 $H^z \sum_i s_i^z$ を加えた形で解かれている。

Ising 相互作用に加えて x 方向の磁場 $H^x \sum_i s_i^x$ をかけたものを、横磁場 Ising 模型 (transverse Ising 模型) とよぶ。1 次元、スピン $1/2$ の transverse Ising 模型は、まずその零磁場での横磁場帯磁率が 1960 年に Fisher[11] によって得られ、1970 年に Pfeuty[12] が自由エネルギーを求めた。またこれは 1962 年の桂の XY 模型の厳密解の特殊な場合に相当する。さらに 2 次元における厳密な横磁場帯磁率が 1963 年に Fisher[13] によって得られている。このとき $s_i^x = (s_i^+ + s_i^-)/2$ であるので、横磁場の項はそれぞれのスピンの H^x に比例する確率で独立に反転する 1 体の flip に相当する。また一般のスピン S で、相互作用を $(s_i^z)^m (s_j^z)^n$ と一般化したものの零磁場での横磁場帯磁率が、南

[14][15] によって得られている。これは n 状態の生態系に対応する。

これらの模型の間には等価性が存在することが 1972 年に鈴木 [4] によって指摘されている。ここでこの等価性という意味を説明する。Ising 模型はハミルトニアンを構成する演算子 s_i^z どうしが可換であるため古典系とよばれる。この 2 次元 Ising 模型は伝送行列 V の固有値問題に帰着して解かれ、その最大固有値から自由エネルギーが得られる。この最大固有値の固有状態を ϕ とすると、この模型における物理量の期待値は、その物理量に対応する演算子と ϕ とから得られる。一方で XY 模型や transverse Ising 模型はハミルトニアンを構成する演算子どうしが可換でない。量子力学における量子効果は、物理量に対応する演算子の非可換性から生じるので、これらの模型は量子系とよばれる。等価性という意味は、適当なパラメータの対応の下で、この量子ハミルトニアン H と 2 次元 Ising 模型の伝送行列 V とが可換、つまり $[H, V] = HV - VH = 0$ が成立しており、したがって H と V とは同時対角化可能であり、共通の固有状態をもつということである。特に伝送行列 V の最大固有値に対応する固有状態と、ハミルトニアン H の基底状態とが一致している。したがってこの $d+1$ 次元古典系における測定値と、 d 次元量子系の基底状態における期待値とは、同一の状態 ϕ から計算されるということになる。

2 次元 Ising 模型と 1 次元 XY 模型とは等価であり、また磁場のある 1 次元 XY 模型の特殊な場合が 1 次元 transverse Ising 模型である。2 次元 Ising 模型は状態の積によってそのエネルギーが決まる模型であり、その相互作用は単純であるが格子が 2 次元であるため簡単には解けない。1 次元 XY 模型は 2 体の flip に相当する相互作用を持ち、格子は簡単であるが相互作用は Ising よりも複雑である。また 1 次元 transverse Ising 模型は簡単な Ising 相互作用をもつものの、1 体の flip に相当する transverse 磁場がかかっている。

この他にもスピン系においては、2 次元 six-vertex 模型と 1 次元 Heisenberg 模型 (XXZ 模型)、2 次元 eight-vertex 模型と 1 次元 XYZ 模型など、いくつかの等価な可解模型の系列が知られている。

3 細胞選別の数理モデルと Ising 模型

細胞選別の模型について説明する。これは 1996 年に望月-巖佐-武田 [16] によって導入されたものである。図 1 のような 2 次元あるいは 1 次元の格子上で、黒と白で区別してある 2 種類の細胞を考える（以下、図はいずれも [16] より転載）。黒と黒が接触しているときの接着のエネルギーを λ_{BB} 、白と白の接着のエネルギーを λ_{WW} 、黒と白との接着のエネルギーを λ_{BW} とする。このとき黒と白の配置（状態）が決まれば、その接着のエネルギーの合計を計算して状態の全エネルギー E が決まる。この状態の実現確率は $\exp(E/m)$ に比例するとする。ただしここで m は単位時間あたりの入れ替えの確率である。この確率の下に隣り合う細胞どうしを入れ替えていくときの定常状態を考える。

図 2 はこの論文で計算された定常状態の様子である。 $A/m = -2$ のとき、黒と白との交互のパターンが現れる。 $A/m = 0$ のときにはほぼランダムなパターン、 A/m が正で大きいときには黒と白とがはっきり分かれたパターンが現れる。このとき $A = \lambda_{BB} + \lambda_{WW} - 2\lambda_{BW}$ は差次接着力とよばれ、細胞の入れ替えに際して全エネルギー E はこの A の整数倍だけ変化する。つまりこの系は

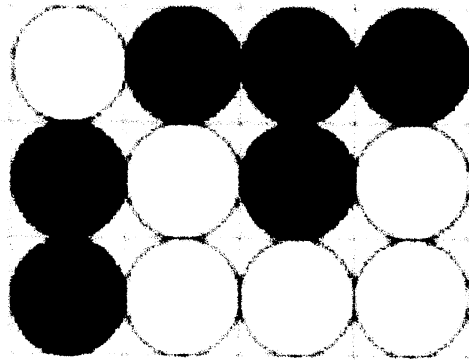


図 1： 白と黒で示した 2 種類の細胞と配列.

λ_{BB} , λ_{WW} , λ_{BW} それぞれによってではなく, A あるいは A/m によってその性質が決まる.

この模型において $\lambda_{BB} = \lambda_{WW}$ としたものは Ising 模型と等価である. 実際, 黒の細胞を up, 白の細胞を down に対応させれば, 隣り合うスピンどうしが同じ向き, つまり up-up または down-down であるときの相互作用のエネルギーは $-J/4$ (黒-黒または白-白の接着力が $\lambda_{BB} = \lambda_{WW}$), 隣り合うスピンどうしが反対向き, つまり up-down であるときの相互作用のエネルギーは $+J/4$ (黒-白の接着力が λ_{BW}) であり, このとき二つのシステムを特徴づける定数の間の対応は $A = -4J$, $m = kT$, したがって $A/m = -4J/kT$ である. 実際に温度 T が大きいときには熱的錯乱によるスピンの反転の頻度は高くなり, これは m が大きくなることに対応し, また相互作用 J は Ising 模型のエネルギースケールを決定する相互作用定数であるが, これは細胞選別の接着力の単位である差次接着力に対応する. 係数の $1/4$ は 2 つのスピンの大きさが $1/2$ であることに由来する定数である.

この対応を考えに入れて再び図 2 を見ると, $A/m = -2$ は反強磁性体に対応し, この黒と白との交互のパターンはスピン系の言葉では Néel 秩序と呼ばれる. $A/m = 0$ はスピンどうしの相互作用がなく, 各々のスピンが独立に反転している状態でこれは常磁性体, A/m が正で大きいときには黒なら黒, 白なら白が隣り合う状態が安定で, 磁性体においてはすべてが黒またはすべてが白の状態が実現し, これは強磁性体と呼ばれる. いまの場合には黒と白の数が等しいという制限をおいているため, 細胞の様子は図のようにまだらのパターンを示す. これはスピンの言葉で言えば, 外部磁場をかけて磁化の値を固定していることに対応する.

したがって, 細胞選別について解析されている種々の量は, Ising 模型における種々の物理量に正確に対応する. 例えば細胞が黒であったとき, その隣りの細胞が黒である確率 q_{BB} は, Ising 模型の相関関数を用いて次のように書ける:

$$\rho_B q_{BB} = \frac{1}{2} \langle s_i^z s_j^z \rangle + \frac{1}{2} + \frac{4m}{z} \quad (3)$$

ただしここで ρ_B は黒の存在比で, いまの場合 $1/2$, z は最近接格子数で, 1 次元では $z = 2$, また 2 次元正方格子では $z = 4$ である.



図2: 各 A/m に対する定常状態. (a) $A/m = -2$. (b) $A/m = -1$. (c) $A/m = 0$. (d) $A/m = 0.6$. (e) $A/m = 1.2$. (f) $A/m = 2$. (g) $A/m = 4$. (h) $A/m = 6$.

1次元のいまのパラメータの場合について、この相関関数を伝送行列の方法で計算すると $q_{BB} = (-\tanh(J/kT) + 1)/2 = (\tanh(A/4m) + 1)/2$ となり、これは細胞選別の模型に対して計算された結果に、当然であるが一致している。2次元の場合は、Ising 模型についてこの相関関数が Onsager によって厳密に計算されている。厳密解は初等関数の2重積分によって最大固有値の対数が書かれ、その固有値の微分によって最近接の相関関数が書かれている。

4 等価性の系列

結局, 生態系の数理モデルとスピン格子模型との間に, 次のような等価性の系列が存在する. 接着力による細胞選別のモデルは, それぞれの次元で Ising 模型と等価であり, 2 次元 Ising 模型は上で述べた意味で 1 次元 XY 模型や 1 次元 transverse Ising 模型と等価である. そして 1 次元 XY 模型や 1 次元 transverse Ising 模型は, 例えば spin up を粒子, down を空白に対応させれば, XY 相互作用は粒子の 2 体の flip に, transverse 磁場は 1 体の flip に, Ising 相互作用は粒子の状態の積で決まるエネルギーに対応する. この 2 体の flip, 1 体の flip, 状態の積のエネルギーからなる生態系のシステムがあれば, その 1 次元の場合が 2 次元の細胞選別のモデルと等価であることがわかる.

この生態系とスピン模型との対応は一般的である. いま n 状態の生態系があり, その生成規則を考えることにする. 生成規則が始状態から変化後の状態への n 次行列で書かれならば, この n 次行列は必ずスピン演算子によって書けることを, 導出は省略するが導いた. ただし対応するハミルトニアンを構成するスピンは一般の大きさ S をもち, S と n には $n = 2S + 1$ の関係があり, ハミルトニアン自体は一般には

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{mn}(s_i^z)^m (s_j^z)^n - H^z \sum_i s_i^z - H^x \sum_i s_i^x \quad (4)$$

のようにスピンのベキを含む複雑なものになる可能性がある. つまり, すべての有限の状態と離散的な生成規則からなる生態系には, それに等価なスピン模型が存在することを示した.

参考文献

- [1] H.Stanley: *Introduction to Phase Transitions and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 1971 (邦訳, スタンリー: 相転移と臨界現象, 東京図書, 1974)
- [2] D.Mattis: *The Theory of Magnetism I and II*, Springer Verlag, 1981, 1985
- [3] R.Baxter: *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982.
- [4] M.Suzuki: Prog. Toer. Phys. 46 (1972) 507.
- [5] E.Ising: Zeitz. F. Physik 31 (1925) 253
- [6] H.Kramers and G.Wannier: Phys. Rev. 60 (1941) 252, 263.
- [7] 久保亮五: 物性論研究 1 (1943) 1
- [8] L.Onsager: Phys. Rev. 65 (1944) 117.
- [9] S.Katsura: Phys. Rev. 127 (1962) 1508.
- [10] T.Niemaijer: Physica 36 (1967) 377.
- [11] M.Fisher: Physica 26 (1960) 618.
- [12] P.Pfeuty: Ann. Phys. 57 (1970) 79.
- [13] M.Fisher: J. Math. Phys. 4 (1963) 124.
- [14] K. Minami: J. Phys. A29 (1996) 6395.

- [15] K. Minami: J. Phys. Soc. Jpn. 67 (1998) 2255.
- [16] A. Mochizuki, Y. Iwasa and Y. Takeda: J. Theor. Biol. 179 (1996) 129.